

Uso do Método de Simulação Gaussiana Sequencial (SGS) na Simulação Estocástica do Fluxo e Transporte em Meio Poroso Saturado

Júlio Gomes

Programa de Pós-Graduação em Gestão Ambiental, Universidade Positivo

jgomes@up.edu.br

Nelson Oswaldo Luna Caicedo

Instituto de Pesquisas Hidráulicas/UFRGS

Pós-Graduação em Engenharia Urbana e Ambiental (PPGEUA), UFPB

nlcaicedo@yahoo.com.br

Recebido: 18/06/10 - revisado: 19/10/10 - aceito: 28/09/11

RESUMO

Os objetivos do presente trabalho são apresentar uma breve revisão sobre técnicas utilizadas na geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica (K) e desenvolver um estudo de caso hipotético de simulação estocástica do fluxo e transporte de contaminantes em um meio poroso saturado, utilizando o método de simulação gaussiana sequencial (SGS) para gerar os campos aleatórios de K com a finalidade de representar a incerteza e a variabilidade espacial da condutividade hidráulica. A estrutura espacial da condutividade hidráulica é descrita por três modelos distintos de variabilidade espacial, representados por variogramas teóricos do tipo gaussiano, exponencial e esférico. O estudo de caso hipotético constituiu-se da propagação de uma pluma de contaminação a partir de uma área contaminada por benzeno de dimensões 80 m x 80 m e concentração de 200 ppb sobre uma área de estudo de 2 km x 1 km, considerando-se um horizonte de 30 anos. Os resultados obtidos para o estudo de caso hipotético mostraram uma maior dispersão da pluma de contaminação para as simulações a partir dos modelos gaussiano e exponencial em comparação às simulações do modelo esférico. São apresentadas também distribuições amostrais de frequência acumulada de concentrações de benzeno para um receptor hipotético, localizado dentro da área de estudo, destacando-se a frequência na qual um valor limite de concentração adotado (10 ppb) é superado.

Palavras-chave: fluxo, transporte, meio poroso, simulação estocástica, simulação gaussiana sequencial.

INTRODUÇÃO

Uma das principais características do problema da contaminação da água subterrânea, em comparação à contaminação das águas de superfície, reside na dificuldade da detecção e no tempo e recursos necessários para a sua remediação.

A tomada de decisão sobre a necessidade de remediação exige, em grande parte dos casos, a modelagem e simulação do fluxo e transporte de contaminantes com os objetivos de auxiliar no processo decisório e de fornecer informações que ajudem na concepção do sistema de remediação. Como ocorre em diversas áreas dos recursos hídricos, duas abordagens distintas podem ser utilizadas: determinística ou estocástica.

A abordagem determinística, via de regra, envolve um processo de calibração dos modelos de fluxo e transporte, a partir de dados observados em

campo, produzindo uma solução única para o problema. Já na abordagem estocástica, os dados observados em campo são utilizados para definir um padrão estatístico para as variáveis dos modelos de fluxo e transporte.

A abordagem estocástica se baseia na obtenção de várias soluções equiprováveis para o problema, a partir do uso de alguma técnica de simulação estocástica. Portanto, uma diferença fundamental entre as duas abordagens é a de que a estocástica não fornece uma solução única, mas sim um conjunto de soluções. Como consequência, esta abordagem tem sido preferida quando existe a necessidade de representação das incertezas em relação às variáveis que caracterizam o problema em análise.

No caso da contaminação da água subterrânea é importante reconhecer as incertezas associadas a diferentes fatores, relacionados tanto ao meio físico, quanto ao contaminante. Um aspecto bastante importante refere-se à variabilidade espacial e à

incerteza associadas à condutividade hidráulica (K), parâmetro fundamental para a determinação da solução do problema de fluxo e, por consequência, do problema de transporte de contaminantes em meio poroso.

Na abordagem determinística, o conjunto de valores observados de K pode ser utilizado para definir um valor único, característico para todo o aquífero, usando alguma técnica de transferência de escala. Já na abordagem estocástica, esse mesmo conjunto de valores de K pode ser utilizado para definir a estrutura espacial da condutividade hidráulica para área de estudo, permitindo representar a sua variabilidade espacial por meio de campos aleatórios. Esta última abordagem é explorada no presente artigo que tem por objetivos apresentar uma breve revisão sobre técnicas utilizadas na geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica (K) e desenvolver um estudo de caso hipotético de simulação estocástica do fluxo e transporte de contaminantes em um meio poroso saturado, utilizando o método de simulação gaussiana sequencial (SGS) para gerar os campos aleatórios de K .

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O conceito de simulação estocástica é apresentado a seguir, de modo formal, baseado no trabalho de Deutsch e Journel (1998).

Considere a distribuição de um (ou mais) atributo(s) $Z(\mathbf{x})$ sobre um campo A qualquer com $\mathbf{x} \in A$. Por simulação estocástica, entende-se o processo de construir modelos alternativos igualmente prováveis de alta resolução da distribuição espacial de $Z(\mathbf{x})$. Cada realização de $Z(\mathbf{x})$ é representada pelo sobrescrito l da seguinte forma: $\{z^{(l)}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in A\}$.

A simulação é dita condicional (ou condicionada) se as realizações resultantes representarem valores observados em diferentes localizações, ou seja (Deutsch e Journel, 1998):

$$z^{(l)}(\mathbf{x}_\alpha) = Z(\mathbf{x}_\alpha), \quad \text{para qualquer } l$$

onde $Z(\mathbf{x}_\alpha)$ representa o valor do atributo $Z(\mathbf{x})$ observado na localização \mathbf{x}_α .

Mantoglou e Wilson (1982) destacam que técnicas de simulação de campos aleatórios multidimensionais têm aplicações importantes em hidrologia e que uma das razões para a geração destes campos é fornecer campos de dados de entrada ou de parâmetros para a simulação de Monte Carlo de

processos físicos. Os campos simulados são usados em modelos determinísticos de simulação hidrológica para se obter múltiplas realizações de resultados. A partir destas realizações, estatísticas dos resultados podem ser calculadas e relacionadas às estatísticas dos dados de entrada ou dos parâmetros (Mantoglou e Wilson, 1982).

Tompson *et al.* (1989) destacam que técnicas numéricas para gerar realizações de campos aleatórios espacialmente correlacionados são frequentemente utilizadas para definir conjuntos de quantidades físicas altamente variáveis em modelos estocásticos de sistemas naturalmente heterogêneos.

Wen e Kung (1993) classificam os métodos de geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica espacialmente correlacionados, de acordo com dois tipos genéricos de abordagens geostatísticas: métodos paramétricos e não paramétricos. São citados como exemplos de métodos paramétricos: método espectral, método da matriz de covariância, método do vizinho mais próximo, método das bandas rotativas e método de simulação gaussiana sequencial (SGS). Como exemplo de método não paramétrico, Wen e Kung (1993) citam o método de simulação de indicadores sequencial (SIS).

Wen e Gómez-Hernández (1998) classificam os métodos de geração de campos aleatórios em métodos multigaussianos e não multigaussianos. Em comparação ao trabalho de Wen e Kung (1993), os métodos multigaussianos e não multigaussianos corresponderiam respectivamente aos métodos paramétricos e não paramétricos.

A diferença básica entre os dois tipos de abordagem refere-se ao fato de que os métodos multigaussianos procuram reproduzir a média e a variância da distribuição teórica usada para representar a variabilidade espacial de um determinado atributo do solo. Já os métodos não multigaussianos procuram reproduzir indicadores, aqui entendidos simplesmente como percentis da distribuição teórica usada na representação de um determinado atributo do solo.

Vários estudos procuram comparar o desempenho dos métodos multigaussianos e dos métodos não multigaussianos na representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica, citando-se os trabalhos de Wen e Kung (1993), Gómez-Hernández e Wen (1998), Wen e Gómez-Hernández (1998) e Zinn e Harvey (2003). Lee *et al.* (2007) apresentam uma extensa relação de estudos realizados e que procuram comparar o desempenho das técnicas multigaussianas e não multigaussianas.

A partir dos estudos citados no parágrafo anterior, pode-se destacar que a maior vantagem dos

modelos multigaussianos é a sua relativa simplicidade, quando comparados aos modelos não multigaussianos. Verifica-se ainda que a maior crítica aos modelos multigaussianos é a de que eles não conseguem reproduzir estruturas de solo, onde são encontradas regiões bem definidas de baixa ou alta condutividade hidráulica, uma vez que a correlação espacial de valores extremos de condutividade hidráulica para este tipo de modelos é relativamente pequena.

Princípio da simulação sequencial

As técnicas de simulação sequencial são usadas para produzir simulações condicionais (ou condicionadas) de campos aleatórios de grandezas (ou atributos) relacionados aos problemas de fluxo e transporte em meio poroso.

O princípio da simulação sequencial, proposto por Johnson (1987), parte da idéia básica de que n eventos dependentes $A_i, i = 1, \dots, n$, podem ser simulados sequencialmente, usando a seguinte expressão (Dowd, 1992):

$$P(A_1, A_2, \dots, A_n) = P(A_n | A_1, A_2, \dots, A_{n-1}) \cdot P(A_{n-1} | A_1, A_2, \dots, A_{n-2}) \dots P(A_2 | A_1) \cdot P(A_1)$$

De modo simples, a simulação sequencial consiste em condicionar a estimativa de uma grandeza em uma posição \mathbf{x} a toda informação disponível na vizinhança de \mathbf{x} , incluindo valores observados e também valores previamente simulados. A abordagem sequencial é apresentada formalmente a seguir, a partir do trabalho de Deutsch e Journel (1998).

Considere a distribuição conjunta de N variáveis aleatórias Z_i com N possivelmente muito grande e o condicionamento destas N variáveis por um conjunto de n dados de qualquer tipo, simbolizado pela notação $| (n)$. A correspondente distribuição de probabilidade condicional acumulada multivariada das N variáveis aleatórias é representada por (Deutsch e Journel, 1998):

$$F_{(N)}(z_1, \dots, z_N | (n)) = P(Z_i \leq z_i, i = 1, \dots, N | (n)) \quad (1)$$

Segundo Deutsch e Journel (1998), aplicações sucessivas do conceito de probabilidade condicional mostram que uma realização das N variáveis aleatórias Z_i pode ser obtida da distribuição de probabilidade condicional acumulada, dada pela Equação 1, em N passos sucessivos, cada qual envolvendo uma distribuição de probabilidade condicional acumulada univariada com um nível crescente de

condicionamento, usando-se o seguinte procedimento:

- *Passo 1:* Determinar uma realização $z_1^{(l)}$ da distribuição de probabilidade condicional acumulada univariada de Z_1 dado o conjunto de dados originais (n) . O valor de $z_1^{(l)}$ assim obtido é então considerado um dado condicionante para as realizações subsequentes. Deste modo, o conjunto de informações (n) é atualizado para um novo conjunto $(n+1) = (n) \cup \{Z_1 = z_1^{(l)}\}$;
- *Passo 2:* Determinar uma realização $z_2^{(l)}$ da distribuição de probabilidade condicional acumulada univariada de Z_2 dado o conjunto de dados $(n+1)$ e atualizar o conjunto de informações para $(n+2) = (n+1) \cup \{Z_2 = z_2^{(l)}\}$;
- *Passo 3:* Considerar sequencialmente todas as N variáveis aleatórias Z_i .

O princípio de simulação sequencial independe do algoritmo ou modelo utilizado para obter a série de distribuições de probabilidade condicional acumulada univariada (Deutsch e Journel, 1998).

Goovaerts (2001) destaca que duas grandes classes de algoritmos de simulação sequencial podem ser estabelecidas: uma classe definida pelo uso do método de simulação gaussiana sequencial (SGS) e outra classe definida pela utilização do método de simulação de indicadores sequencial (SIS).

Uma questão relacionada à simulação estocástica, ainda segundo Goovaerts (2001), é a escolha entre uma abordagem multigaussiana ou não multigaussiana. O referido autor ressalta que não existe uma resposta direta para esta questão e que os usuários devem ter em mente que o modelo multigaussiano não permite uma correlação espacial significativa de valores extremos (altos ou baixos), o que pode ser não desejável (não conservador) para a aplicação de interesse.

Método de simulação gaussiana sequencial

A implantação do princípio de simulação sequencial, sob a hipótese de uma função aleatória multigaussiana, define a chamada simulação gaussiana sequencial (Goovaerts, 1997).

O método de simulação gaussiana sequencial (SGS), apresentado por Isaaks (1990), é segundo Koltermann e Gorelick (1996), o mais poderoso dos algoritmos gaussianos de geração de campos aleatórios. Os referidos autores destacam o fato de que o

SGS, por definição, gera simulações condicionais (ou condicionadas). Marsily *et al.* (1998) destacam o SGS como sendo provavelmente o método mais simples de ser utilizado.

Uma descrição do método de simulação gaussiana sequencial (SGS) pode ser encontrada em, por exemplo, Goovaerts (1997) e Deutsch e Journel (1998).

Deutsch e Journel (1998) apresentam uma série de programas computacionais aplicados à simulação estocástica, entre eles, o programa *sgsim* que usa o método de simulação gaussiana sequencial (SGS) para a geração de campos aleatórios bidimensionais ou tridimensionais para malhas regulares e que foi utilizado no presente trabalho para a geração dos campos aleatórios de K.

No contexto deste trabalho, o método de Monte Carlo é associado ao método de simulação gaussiana sequencial (SGS) para a produção de diversas realizações de campos aleatórios de K para caracterizar a incerteza associada aos problemas de fluxo e transporte em meio poroso em função da variabilidade espacial e da amostragem fragmentada da condutividade hidráulica.

Existem inúmeros trabalhos na literatura técnica que utilizam ou comparam o SGS a outros métodos para a geração de campos aleatórios. Como exemplos, podem ser citados os trabalhos de Dowd (1992), Wen e Kung (1993), Koltermann e Gorelick (1996), Gómez-Hernández (1998), Wen e Gómez-Hernández (1998), Goovaerts (2001), Zhang e Pinder (2003), Zinn e Harvey (2003), Ballio e Guadagnini (2004) e Lee *et al.* (2007).

METODOLOGIA

A metodologia adotada consistiu basicamente em explorar um estudo de caso hipotético de contaminação residual em um aquífero freático sem a presença de contaminantes em fase livre.

Área de estudo

A área de estudo hipotética correspondeu a um aquífero freático (livre) com forma retangular, cujas dimensões são apresentadas na Figura 1. A área sombreada na Figura 1 representa a área contaminada.

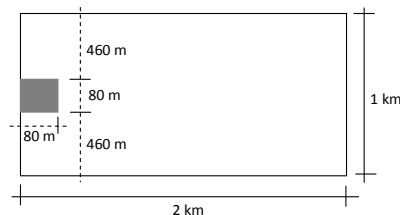


Figura 1 - representação esquemática da área de estudo

Dados básicos para a modelagem do fluxo e transporte do contaminante

As condições de contorno adotadas para o problema de fluxo foram cargas hidráulicas constantes de 10 m e 9 m respectivamente nas bordas esquerda e direita (fronteiras oeste e leste) da área de estudo. Assumiu-se também uma recarga de 260 mm/ano para a área de estudo.

Já para o problema de transporte, adotou-se, por hipótese, a presença do contaminante benzeno com uma concentração de 0,2 mg/L (200 ppb) na fonte de contaminação. Para efeito de comparação, a Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (*U. S. Environmental Protection Agency* – USEPA) sugere concentrações de benzeno variando entre 1 ppb e 10 ppb para um nível de risco à saúde humana de 10^{-6} , que representa um caso adicional de câncer para uma população de um milhão de pessoas expostas (USEPA, 2000). O Ministério da Habitação, Planejamento Espacial e Meio Ambiente (*Ministry of Housing, Spatial Planning and Environment* - VROM) da Holanda adota 30 ppb como um valor de intervenção para o benzeno na água subterrânea (VROM, 2000). Como um exemplo no Brasil, a Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (CETESB) do estado de São Paulo sugere 5 ppb como um valor orientador para intervenção nas águas subterrâneas (Casarini *et al.*, 2001).

A Tabela 1 apresenta algumas informações básicas utilizadas para a modelagem dos problemas de fluxo e transporte. As informações relacionadas especificamente ao benzeno foram obtidas a partir de Montgomery e Welton (1991).

Os valores de K usados no presente trabalho foram extraídos de Houston e Braun (2004) e foram considerados como ocorrendo na área de estudo hipotética. As condutividades hidráulicas variaram entre $7,06 \times 10^{-7}$ m/s (0,06 m/dia) e $7,07 \times 10^{-4}$ m/s (61,0 m/dia), apresentando portanto uma variação de 3 ordens de grandeza (potência de 10). A média geométrica das condutividades hidráulicas resultou em $3,04 \times 10^{-5}$ m/s (2,63 m/dia) e as distâncias entre

os pontos de amostragem de K variaram entre aproximadamente 150 m a 3800 m, com uma distância média de 1627 m.

Tabela 1 - Informações básicas para o estudo de caso

Propriedade	Unidade	Valor
densidade das partículas	g/cm ³	2,65
densidade do solo	g/cm ³	1,46
porosidade	adim.	0,45
porosidade efetiva	adim.	0,25
fração de carbono orgânico	%	0,6
coeficiente de partição entre octanol e água (log K _{ow})	adim.	2,13
coeficiente de difusão molecular do contaminante na fase aquosa (D _m)	m ² /dia	9,42 x 10 ⁻⁵

Geração dos campos aleatórios de K

Os campos aleatórios de K foram gerados sob a hipótese de heterogeneidade e isotropia, ou seja, os valores de condutividade hidráulica (K) nas direções x e y variaram em cada ponto da área de estudo (heterogeneidade), mas eram iguais entre si em todos os pontos da área de estudo (isotropia). A hipótese de isotropia foi adotada em razão dos dados extraídos de Houston e Braun (2004) não permitirem uma análise mais aprofundada quanto à anisotropia do meio poroso em relação à condutividade hidráulica.

O procedimento utilizado para a geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica (K) seguiu procedimento que caracteriza o método da simulação gaussiana sequencial (SGS), conforme apresentado em Deutsch e Journel (1998). Como se trata de um estudo de caso hipotético, alguns passos do referido procedimento não foram necessários, uma vez que os variogramas amostrais foram definidos hipoteticamente, embora baseados nos valores de K extraídos de Houston e Braun (2004).

Para a representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica foram definidos três diferentes modelos espaciais (variogramas), a saber: gaussiano, exponencial e esférico. Adotou-se ainda a hipótese de que a condutividade hidráulica segue uma distribuição lognormal.

O modelo computacional *sgsim* foi utilizado para gerar realizações equiprováveis de campos aleatórios da variável normal padronizada z. A definição e o formato dos dados de entrada do referido modelo podem ser obtidos a partir de Deutsch e Journel (1998). Aqui são destacados, como dados de entrada, principalmente: o número de simulações, a definição da malha a ser simulada e o modelo teórico de variograma. Adotou-se uma malha regular de 50 células x 50 células com discretizações Δx e Δy, iguais a 40 m e 20 m, respectivamente.

Foram gerados campos de condutividade hidráulica para os três modelos distintos de variograma: gaussiano, exponencial e esférico. Estes três modelos são ditos estacionários. Fisicamente, se uma função aleatória Z(x) é dita estacionária, significa que o fenômeno é homogêneo no espaço e, por assim dizer, se repete em todo o espaço (Chilès e Delfiner, 1999). Foram adotados os mesmos valores dos parâmetros efeito-pepita, patamar e amplitude para os três modelos de variogramas teóricos, iguais respectivamente a 0, 1 e 500. A Figura 2 mostra uma comparação dos variogramas teóricos adotados para a geração dos campos aleatórios de K.

Verifica-se, a partir da Figura 2, que o modelo exponencial tende a representar melhor a variabilidade em pequena escala por apresentar maiores ordenadas do variograma para pequenas distâncias, enquanto o modelo gaussiano tende a representar melhor a variabilidade em grande escala por apresentar maiores ordenadas para distâncias maiores.

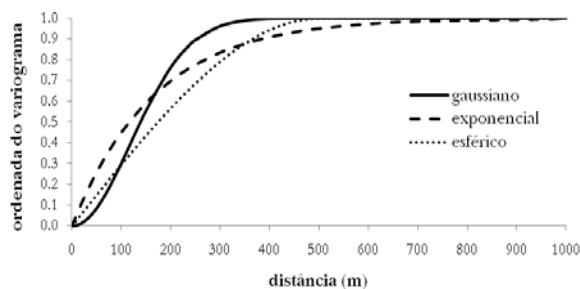


Figura 2 - Comparação dos modelos teóricos de variograma

Modelagem do fluxo e do transporte no meio poroso saturado

O problema de fluxo foi modelado considerando-se regime permanente, uma hipótese razoável para estudos de avaliação de contaminação para horizonte de tempo da ordem de 20 a 30 anos. A

contaminação da água subterrânea se dá supostamente pela presença do contaminante benzeno, que possui uma alta solubilidade em água.

Adotou-se, por hipótese, fluxo bidimensional (plano horizontal) e transporte tridimensional com a contaminação residual presente ao longo de metade da espessura do aquífero.

O modelo computacional utilizado para a análise do problema de fluxo foi o modelo FLUXSAT, que trata do fluxo permanente tridimensional em meio poroso saturado, cuja concepção é apresentada em Gomes (2008). O modelo FLUXSAT resolve numericamente a equação a seguir que descreve o fluxo permanente em meio poroso saturado não homogêneo e anisotrópico.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) = 0 \quad (2)$$

onde: K = condutividade hidráulica [LT^{-1}];
 h = carga hidráulica [L];
 x, y e z = direção dos eixos coordenados.

Duas hipóteses importantes relacionadas à Equação 2 são a densidade da água constante e o alinhamento dos eixos coordenados x, y e z com as direções principais do tensor da condutividade hidráulica (Gomes, 2008).

O modelo FLUXSAT, apresentado em Gomes (2008), foi baseado principalmente no trabalho de McDonald e Harbaugh (1988) que descreve um modelo computacional de fluxo transiente tridimensional em meio poroso saturado, baseado em um esquema de diferenças finitas. O referido trabalho representa a base do modelo computacional MODFLOW, provavelmente o mais popular dos modelos computacionais de fluxo em meio poroso saturado.

Destaca-se que o modelo FLUXSAT foi desenvolvido para possibilitar a execução de várias simulações consecutivas sem a interferência do usuário, a partir de diferentes campos de condutividade hidráulica (K). No presente trabalho, foram realizadas 200 simulações de fluxo, a partir dos campos de condutividade hidráulica gerados.

O modelo computacional utilizado para a análise do problema de transporte foi o modelo TRANSPSAT, que trata do transporte tridimensional em meio poroso saturado sob regime de fluxo permanente, cuja concepção é apresentada em Gomes (2008). O referido modelo computacional considera os seguintes processos básicos no transporte de contaminantes em meio poroso saturado: advecção,

dispersão hidrodinâmica (dispersão + difusão molecular) e sorção (hipóteses de substância conservativa, equilíbrio local e sorção linear), segundo a equação a seguir (Gomes, 2008):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - v_i^* \frac{\partial C}{\partial x_i} - \frac{q_c}{R\phi_c} (C - C_c) \quad (3)$$

onde: C = concentração do contaminante dissolvido na água subterrânea [ML^{-3}];

x_i = distância ao longo do respectivo eixo coordenado x_i [L];

D_{ij} = coeficiente de dispersão hidrodinâmica [L^2T^{-1}];

q_c = fluxo volumétrico de fonte/sumidouro externos por unidade de volume do aquífero [T^{-1}];

C_c = concentração de contaminante dissolvido em fonte/sumidouro externos [ML^{-3}];

ϕ_c = porosidade efetiva [adimensional];

v_i^* = v_i/R ;

v_i = velocidade média na escala do poro na direção do eixo coordenado x_i [LT^{-1}];

R = coeficiente de retardo [adimensional];

t = tempo [T].

A Equação 3 pode ser obtida a partir de Zheng (1990), sob a hipótese do contaminante ser uma substância conservativa.

O desenvolvimento do modelo TRANSPSAT foi baseado principalmente no trabalho de Zheng (1990) que descreve um modelo computacional de transporte tridimensional para a simulação dos processos de dispersão, advecção e reações químicas de contaminantes dissolvidos em meio poroso saturado sob regime transiente. O referido trabalho representa a base do modelo computacional MT3D, um dos mais populares modelos computacionais de transporte em meio poroso saturado. O método numérico utilizado para a solução da equação do transporte é o método das características modificado (MMOC).

O modelo TRANSPSAT permite a execução de várias simulações consecutivas sem a interferência do usuário, a partir dos campos de velocidades e cargas hidráulicas, gerados pelo modelo FLUXSAT para os diferentes campos de condutividade hidráulica. No presente trabalho foram realizadas 200 simulações de transporte, a partir dos campos de velocidade e de cargas hidráulicas gerados pelo modelo FLUXSAT.

Portanto, o fluxo e o transporte de contaminantes em meio poroso saturado foram modelados utilizando-se o equacionamento usual dos mo

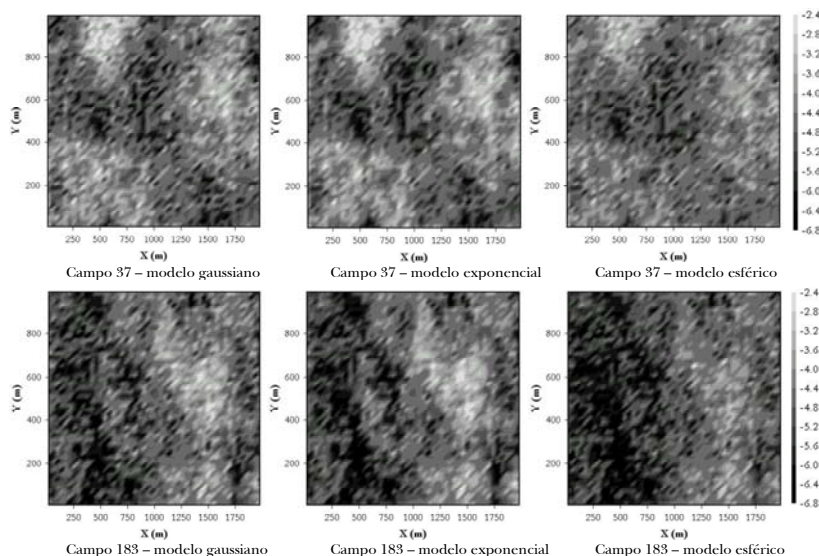


Figura 3 - Exemplos de campos aleatórios gerados para o logaritmo da condutividade hidráulica (K em m/s)

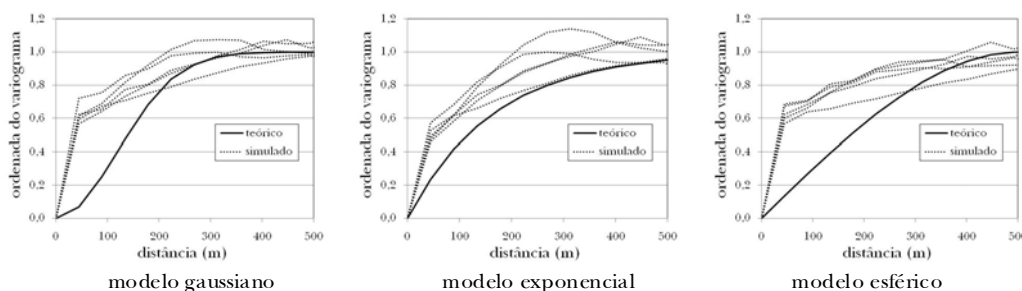


Figura 4 - Comparação entre os variogramas teóricos e alguns variogramas simulados (campos 9, 69, 71, 149 e 176)

delos determinísticos. O componente estocástico foi inserido pela resolução do mesmo problema diversas vezes, onde, em cada solução, adotava-se um campo diferente de condutividade hidráulica para a área de estudo.

Embora outros parâmetros relativos ao fluxo e transporte de contaminantes também pudessem considerados como aleatórios, adotou-se, no presente trabalho, apenas a condutividade hidráulica como variável aleatória. Mesmo assim, do ponto de vista do transporte de contaminantes em meio poroso saturado, tal procedimento implica em conferir um caráter estocástico aos termos advectivo e dispersivo da equação de transporte, uma vez que cada solução do problema de fluxo gera um campo de velocidades distinto que é utilizado na solução do problema de transporte.

RESULTADOS E ANÁLISE

Geração dos campos aleatórios

Os campos aleatórios de K, como mencionado anteriormente, foram gerados utilizando-se o método da simulação gaussiana sequencial e considerando-se os variogramas apresentados na Figura 2. A Figura 3 apresenta uma exemplo de realização de dois campos aleatórios de condutividade hidráulica para os modelos gaussiano, exponencial e esférico.

Considerando-se os dados extraídos de Houston e Braun (2004), a média e o desvio-padrão dos logaritmos dos valores observados de condutividade hidráulica (log K) resultaram em -4,5 e 0,80, respectivamente. A média de (log K) para os campos gerados pelos modelos gaussiano, exponencial e esférico resultaram respectivamente em -4,6; -4,7 e -4,8. Já os desvios-padrão de (log K) resultaram em

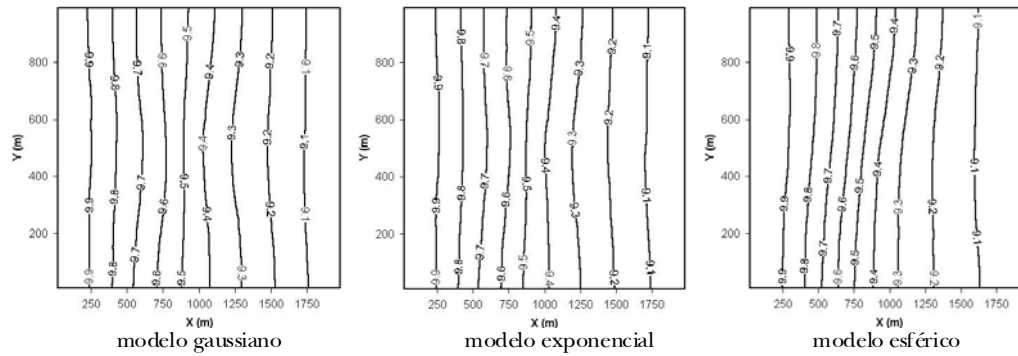


Figura 5 - Valores médios dos níveis simulados do lençol freático (em m)

0,66; 0,67 e 0,61, respectivamente, para os modelos gaussiano, exponencial e esférico. Verifica-se portanto que o processo de geração resultou em valores médios de ($\log K$) um pouco inferiores aos observados e com uma menor dispersão.

A Figura 4 apresenta um comparação entre os variogramas teóricos utilizados para a geração dos campos aleatórios e os variogramas obtidos a partir dos valores de condutividade hidráulica de cinco campos aleatórios gerados e selecionados aleatoriamente.

Verifica-se, a partir da Figura 4, que as ordenadas dos variogramas relativos aos campos aleatórios gerados resultaram, de modo geral, superiores às ordenadas dos variogramas teóricos utilizados na geração dos campos. Este comportamento foi devido ao condicionamento da geração dos campos aleatórios aos valores de condutividade hidráulica extraídos de Houston e Braun (2004), que sugerem uma variabilidade espacial da condutividade hidráulica superior à representada pelos variogramas teóricos utilizados na geração dos campos.

Problema de fluxo

A análise dos resultados, em termos da solução do problema de fluxo, compreendeu a análise da média e do desvio-padrão dos níveis da superfície piezométrica e dos valores médios de velocidade de Darcy, considerando as simulações realizadas para cada um dos modelos utilizados para representar a variabilidade espacial de K .

A Figura 5 apresenta os níveis médios simulados da superfície piezométrica para os três modelos de variabilidade espacial utilizados. Verifica-se, a partir da Figura 5, que a distribuição dos valores médios dos níveis simulados, a partir dos modelos

gaussiano e exponencial, resultaram semelhantes entre si, apresentando inclusive uma certa simetria em relação a um eixo paralelo à fronteira sul (borda inferior) do aquífero, passando pelo centro da área de estudo. Já os resultados a partir do modelo esférico se mostraram distintos em relação aos modelos gaussiano e exponencial, principalmente em termos da simetria destacada anteriormente.

É importante destacar que a variabilidade espacial de K faz com que as linhas equipotenciais médias, apresentadas na Figura 5, não sejam retílineas e paralelas, como seria de se esperar na solução de um problema de fluxo permanente em um aquífero homogêneo com as mesmas condições de contorno aqui adotadas. Ressalta-se que a hipótese de estacionariedade é adotada sobre o modelo de variação espacial (variograma) da condutividade hidráulica e que a simulação condicional implica no uso dos valores observados para a geração dos campos, o que explica o comportamento das linhas equipotenciais médias, apresentadas na Figura 5.

Os valores do desvio-padrão dos níveis simulados resultaram menores para o modelo gaussiano em comparação aos modelos exponencial e esférico. No caso do modelo gaussiano, o desvio-padrão máximo resultou na ordem de 16 cm, enquanto que, para os modelos exponencial e esférico, resultou na ordem de 18 cm.

O desvio-padrão dos níveis simulados resultou relativamente baixo quando comparado ao desnível máximo de 1 m, existente entre as bordas oeste e leste do aquífero. No entanto, deve-se ressaltar que a adoção de condições de contorno do tipo carga hidráulica constante nos contornos oeste e leste do aquífero acabam restringindo a variação dos níveis simulados dentro da área de estudo, ajudando a reduzir o desvio-padrão dos níveis da superfície piezométrica.

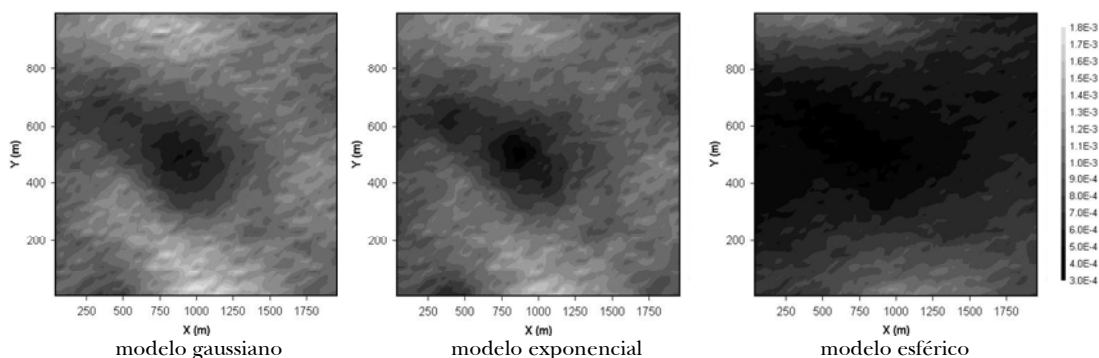


Figura 6 - Valores médios das velocidades de Darcy simuladas (em m/dia)

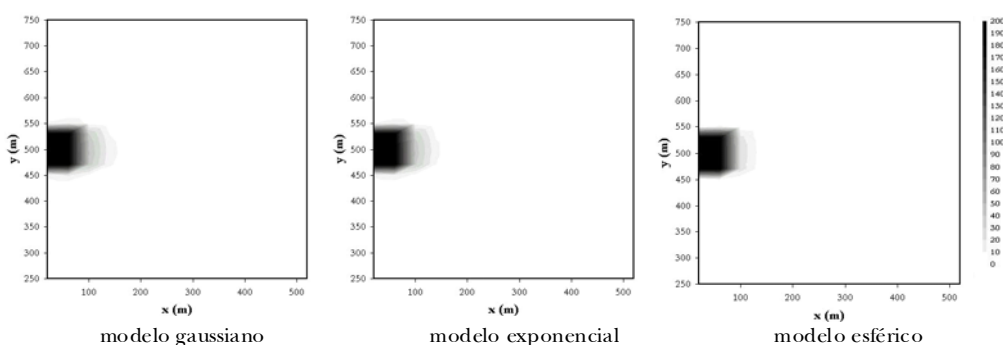


Figura 7 - Plumas médias de contaminação para o horizonte de 30 anos (concentrações em ppb)

Verifica-se, a partir da Figura 6, que os modelos gaussiano e exponencial apresentaram maiores valores médios da velocidade de Darcy em comparação ao modelo esférico. Uma possível explicação para este resultado é a tendência do modelo esférico apresentar, em termos médios, campos com menores valores de condutividade hidráulica em relação aos demais modelos.

Problema de transporte

A análise dos resultados, em termos da solução do problema de transporte, compreendeu a análise comparativa da dispersão das plumas médias de contaminação e das distribuições de frequência acumulada de concentrações para um receptor hipotético localizado dentro da área de estudo.

A Figura 7 apresenta as plumas médias de contaminação simuladas para os modelos gaussiano, exponencial e esférico para o horizonte de 30 anos.

As regiões apresentadas em tons de cinza na Figura 7 representam as áreas cuja concentração de benzeno resultou superior (em termos médios) a 10 ppb, considerado como valor limite para a concentração de benzeno dissolvido na água subterrânea, conforme recomendação em USEPA (2000). A Tabela 2 apresenta algumas características relacionadas às plumas médias de concentração de benzeno obtidas nas simulações para um horizonte de 30 anos.

Destaca-se que as características das plumas médias, apresentadas na Tabela 2, são indicativos da dispersão da pluma de contaminação. Maiores valores de concentração média, concentração máxima e afastamento em relação ao centro de massa da área contaminada (40 m, 0 m) indicam maior dispersão da pluma. Desta forma, os valores apresentados na Tabela 2 mostram uma maior dispersão das plumas médias produzidas pelos modelos gaussiano e exponencial em comparação à produzida pelo modelo esférico.

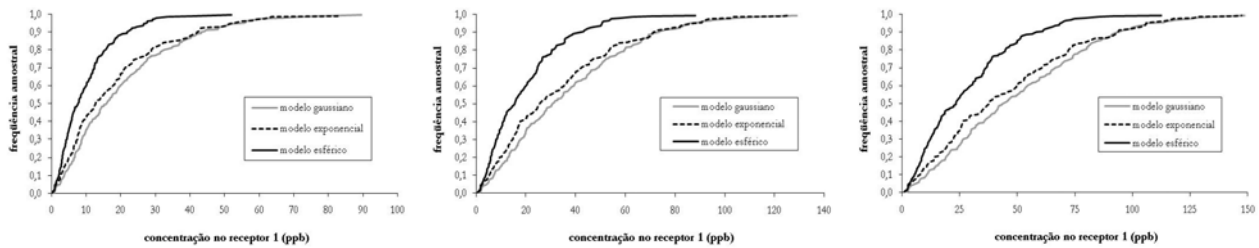


Figura 8 - Distribuições amostrais de frequências acumuladas de concentrações para o receptor hipotético 1 para os horizontes de 10, 20 e 30 anos

Tabela 2 - Características das plumas médias de contaminação simuladas (t = 30 anos)

Característica*	Modelo		
	gaussiano	exponencial	esférico
Concentração média (ppb)	0,14	0,13	0,07
desvio-padrão concentrações (ppb)	2,07	1,86	1,12
Concentração máxima (ppb)	51,0	45,7	27,7
abscissa do centro de masas da pluma (m)	99,7	99,5	93,7
ordenada do centro de masas da pluma (m)	-2,2	-2,5	-0,4

Obs: *não considerando as concentrações da área fonte

Adotou-se, de modo hipotético, a existência de um receptor localizado no eixo de simetria (sentido oeste-leste) da área de estudo a uma distância aproximada de 200 m do centro da área contaminada. A Figura 8 apresenta a distribuição de frequências acumuladas de concentrações para o referido receptor, considerando-se os horizontes de 10, 20 e 30 anos.

Verifica-se, a partir da Figura 8, que as distribuições de frequências acumuladas das concentrações de benzeno, obtidas a partir das simulações dos modelos gaussiano e exponencial, resultaram em maiores valores de concentração para o receptor para um mesmo valor de frequência em comparação à distribuição obtida a partir do modelo esférico.

Os resultados obtidos nas simulações mostraram concentrações para o receptor de 43,8 ppb, 37,7 ppb e 23,5 ppb para a frequência de 50% e de 106,0 ppb, 106,0 ppb e 68,8 ppb para a frequência de 95%, respectivamente para os modelos gaussiano,

exponencial e esférico, considerando-se o horizonte de 30 anos.

O valor limite de 10 ppb apresentou uma frequência acumulada para o receptor para o horizonte de 30 anos de aproximadamente 8,8%, 13,7% e 24,7% para os modelos gaussiano, exponencial e esférico, respectivamente, representando frequências de excedência de 91,2%, 86,3% e 75,3%.

Análise do número de simulações

A análise do número de simulações consistiu basicamente em verificar a variação da frequência de excedência da concentração limite de 10 ppb para o receptor em razão do número de simulações. A justificativa adotada para tal critério foi o de que a chance de um determinado valor limite de concentração ou de risco ser ultrapassado constitui um parâmetro importante na tomada de decisão de remediação de um local contaminado em avaliações de risco relacionadas à contaminação da água subterrânea.

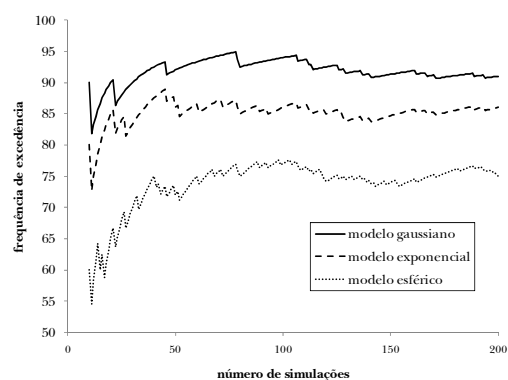


Figura 9 - Frequências de excedência em relação à concentração limite (10 ppb) no receptor em função do número de simulações para horizonte de 30 anos.

A Figura 9 apresenta as freqüências de excedência em relação à concentração limite de 10 ppb no receptor em função do número de simulações para um horizonte de 30 anos.

Verifica-se, a partir da Figura 9, que a freqüência de excedência da concentração limite de 10 ppb começa a se estabilizar a partir de número de simulações superior a 100.

CONCLUSÕES

O presente trabalho, além de apresentar uma breve revisão sobre técnicas utilizadas na geração de campos aleatórios de condutividade hidráulica, buscou mostrar o estudo de um caso hipotético de simulação estocástica de fluxo e transporte de contaminantes em meio poroso saturado, utilizando o método de simulação gaussiana sequencial (SGS) para a geração dos campos aleatórios de condutividade hidráulica.

As conclusões apresentadas são relativas aos resultados obtidos para o referido estudo de caso, que consistiu basicamente em um problema de contaminação residual em um aquífero freático, caracterizando a ausência de contaminantes em fase livre.

Os campos aleatórios de K foram gerados sob as hipóteses de heterogeneidade e isotropia para o meio físico. A hipótese de isotropia assumiu um caráter de simplificação do problema, uma vez que os dados disponíveis, mesmo em se tratando de um estudo de caso hipotético, não permitiram um estudo mais aprofundado da anisotropia da condutividade hidráulica.

A representação da variabilidade espacial da condutividade hidráulica (K) na área de estudo foi feita através da adoção de diferentes modelos de variabilidade espacial (variogramas). Foram utilizados três modelos de variogramas estacionários: gaussiano, exponencial e esférico.

Os campos aleatórios de K apresentaram condutividades médias inferiores e uma menor dispersão em comparação aos valores observados, especialmente aqueles gerados a partir do modelo esférico. Verificou-se também que os campos gerados apresentaram, de modo geral, uma maior variabilidade espacial em comparação aos variogramas teóricos usados na geração dos mesmos.

Em termos da solução do problema de fluxo, a distribuição espacial dos valores médios dos níveis simulados da superfície piezométrica, obtida para os modelos gaussiano e exponencial, resultaram semelhantes entre si, apresentando inclusive

uma certa simetria em relação a um eixo no sentido oeste-leste passando pelo centro da área de estudo. Já os resultados do modelo esférico se mostraram distintos em relação aos modelos gaussiano e exponencial, principalmente em termos da simetria destacada anteriormente.

O modelo gaussiano apresentou menores valores de desvio-padrão dos níveis simulados em comparação aos modelos exponencial e esférico. Os valores de desvio-padrão dos níveis simulados quando comparados ao desnível máximo resultaram relativamente baixos. No entanto, deve-se ressaltar que a adoção de condições de contorno do tipo carga hidráulica constante acabam restringindo a variação dos níveis simulados dentro da área de estudo, reduzindo o desvio-padrão.

Além disso, os modelos gaussiano e exponencial apresentaram maiores valores médios de velocidade de Darcy em comparação ao modelo esférico. Uma possível explicação foi a tendência do modelo esférico produzir, em termos médios, campos com valores de condutividade hidráulica inferiores aos demais modelos.

As plumas médias de contaminação apresentaram maior dispersão para os modelos gaussiano e exponencial em comparação ao modelo esférico, principalmente em razão do mesmo apresentar menores velocidades de Darcy.

As distribuições de freqüência acumulada das concentrações de benzeno para um receptor localizado a aproximadamente 200 m do centro da área contaminada (no eixo oeste-leste), obtidas a partir das simulações dos modelos gaussiano e exponencial, resultaram em maiores valores de concentração para um mesmo valor de freqüência em comparação à distribuição obtida a partir do modelo esférico.

A análise da influência do número de simulações sobre os resultados obtidos mostrou que a freqüência de excedência da concentração limite de 10 ppb para o receptor hipotético começa a se estabilizar a partir de número de simulações superior a 100.

REFERÊNCIAS

- BAGLIO, F.; GUADAGNINI, A. Convergence assessment of numerical monte carlo simulations in groundwater hydrology. *Water Resources Research*. v. 40, W04603, 2004. (doi: 10.1029/2003wr002876).
- CASARINI, D. C. P. et al. *Relatório de estabelecimento de valores orientadores para solos e águas subterrâneas*.

- neas para o estado de São Paulo. São Paulo : CETESB, 2001. 73 p. + apêndices. (Série Relatórios Ambientais).
- CHILÈS, J. P.; DELFINER, P. *Geostatistics: modeling spatial uncertainty*. New York : John Wiley & Sons, 1999. 695 p.
- DEUTSCH, C. V.; JOURNEL, A. G. *Gslib: geostatistical software library and user's guide*. 2. ed. New York: Oxford University Press, 1998. 369 p. Coleção Applied Geostatistics Series.
- DOWD, P. A. A review of recent developments in geostatistics. *Computers & Geosciences*, v. 17, n. 10, p. 1481-1500, 1992.
- GOMES, J. Uso de uma abordagem estocástica para a avaliação do risco à saúde humana devido à ingestão de água subterrânea contaminada. Porto Alegre : I-PH/UFRGS, 2008. 302 p. Tese de Doutorado submetida ao Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- GÓMEZ-HERNÁNDEZ, J. J.; WEN, X. H. To be or not to be multi-gaussian?: a reflection on stochastic hydrogeology. *Advances in Water Resources*, v. 21, n. 1, 47-61, 1998.
- GOOVAERTS, P. *Geostatistics for natural resources evaluation*. New York : Oxford University Press, 1997. 483 p. Coleção Applied Geostatistics Series.
- GOOVAERTS, P. Geostatistical modelling of uncertainty in soil science. *Geoderma*, v. 103, p. 3-26, 2001.
- HOUSTON, N. A.; BRAUN, C. L. *Analyses and Estimates of hydraulic conductivity from slug tests in alluvial aquifer underlying Air Force Plant 4 and Naval Air Station-Joint Reserve Base Carswell Field, Fort Worth, Texas*. U.S. Geological Survey, 2004. U.S. Geological Survey Scientific Investigations Report 2004-5225, 22 p.
- ISAAKS, E. H. *The application of Monte Carlo methods to the analysis of spatially correlated data*. Stanford : Stanford University, 1990. 213 p. PhD Thesis submitted to the Department of Applied Earth Sciences, Stanford University, USA.
- JOHNSON, M. E. *Multivariate statistical simulation*. New York : John Wiley & Sons, 1987. 230 p.
- KOLTERMANN, C. E.; GORELICK, S. M. Heterogeneity in sedimentary deposits: a review of structure-imitating, process-imitating, and descriptive approaches. *Water Resources Research*, v. 32, n. 9, p. 2617-2658, 1996.
- LEE, S. Y.; CARLE, S. F.; FOGG, G. E. Geological heterogeneity and a comparison of two geostatistical models: sequential gaussian and transition probability-based geostatistical simulation. *Advances in Water Resources*. v. 30, p. 1914-1932, 2007. (doi: 10.1016/j.advwatres.2007.03.005).
- McDONALD, M. G.; HARBAUGH, A. W. *A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model*. Washington: U. S. Government Printing Office, 1988. paginação irregular. (Techniques of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey. Book 6 - Modeling Techniques. Chapter A1).
- MANTOGLIOU, A.; WILSON, J. L. The turning bands method for simulation of random fields using line generation by a spectral method. *Water Resources Research*, v. 18, n. 5, p. 1379-1394, 1982.
- MARSILY, G. de *et al*. Some current methods to represent the heterogeneity of natural media in hydrogeology. *Hydrogeology Journal*, v. 6, p. 115-130, 1998.
- MONTGOMERY, J. H.; WELTON, L. M. *Groundwater chemical desk reference*. Chelsea: Lewis, 1991. 2 volumes.
- TOMPSON, A. F. B.; ABABOU, R.; GELHAR, L. W. Implementation of the three-dimensional turning bands random field generator. *Water Resources Research*, v. 25, n. 10, p. 2227-2243, 1989.
- USEPA. U. S. Environmental Protection Agency. Integrated risk information system (IRIS). *Benzene (CASRN 71-43-2) : IRIS summaries : carcinogenicity assessment for lifetime exposure*. USEPA, 2000. Disponível em: <http://www.epa.gov/ncea/iris/subst/0276.htm>.
- VROM. Netherlands Ministry of Housing, Spatial Planning and Environment. *Circular on target values and intervention values for soil remediation*. The Hague: VROM, 2000. 11 p. + anexos. (DBO/1999226863)
- WEN, X. H.; GÓMEZ-HERNÁNDEZ, J. J. Numerical modeling of macrodispersion in heterogeneous media: a comparison of multi-gaussian and non-multi-gaussian models. *Journal of Contaminant Hydrology*, v. 30, 129-156, 1998.
- WEN, X. H.; KUNG, C. S. Stochastic simulation of solute transport in heterogeneous formation: a comparison of parametric and nonparametric geostatistical approaches. *Ground Water*, v. 31, n. 6, p. 953-965, 1993.
- ZHANG, Y.; PINDER, G. Latin hypercube lattice sample selection strategy for correlated random hydraulic conductivity fields. *Water Resources Research*, v. 39, n. 8, 1226, 2003 (doi: 10.1029/2002wr001822, SBH 11.1-11.11).
- ZHENG, C. *MT3D : a modular three-dimensional transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems*. Rockville : S.S. Papadoulos & Associates, 1990. Páginação Irregular.
- ZINN, B.; HARVEY, C. F. When good statistical models of aquifer heterogeneity go bad: a comparison of flow, dispersion, and mass transfer in connected and multivariate Gaussian hydraulic conductivity fields. *Water Resources Research*, v. 39, n. 3, 1051, 2003 (doi:

10.1029/2001wr001146, SBH 4.1-4.15).

Use of the Sequential Gaussian Simulation Method (SGS) for Stochastic Simulation of Flow and Transport in Saturated Porous Media

ABSTRACT

The aims of this paper are to present a brief review of techniques used to generate random fields of hydraulic conductivity (K) and to develop a hypothetical case study of stochastic simulation of the flow and transport of contaminants in saturated porous media. The sequential Gaussian simulation method (SGS) is applied to generate the random fields of K in order to represent uncertainty and spatial variability of hydraulic conductivity. The spatial structure of hydraulic conductivity is described by three distinct models of spatial variability, represented by Gaussian, Exponential and Spherical theoretical variograms. The hypothetical case study consisted in spreading a contamination plume from an area contaminated with benzene. The contaminated area is 80 m long x 80 m wide and the study area is 2 km long x 1 km wide. The assumed benzene concentration of the contaminated area was 200 ppb. The simulations comprised a 30-year period and the results showed a greater development of the contamination plume when the Gaussian and Exponential models were used compared to the Spherical model. It also presented the cumulative frequency distributions of benzene concentration for one hypothetical receptor located within the study area. The frequency associated to an assumed threshold concentration (10 ppb) is highlighted.

Key-words: *flow, transport, porous media, stochastic simulation, sequential Gaussian simulation*